

Фазовые превращения в сплавах $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$: исследования с помощью первопринципных методов

Кошкин Алексей Борисович

Загребин Михаил Александрович

Челябинский государственный университет

Бучельников Василий Дмитриевич

koshkin.alexei2016@yandex.ru

В настоящее время интерес к обогащенным железом силицидам основан на широком спектре потенциальных применений, начиная от использования в качестве конструкционных материалов для магнитных применений до использования в качестве диффузионных барьеров и контактов в микроэлектронике.

Сплавы Fe–Si хорошо известны как превосходные магнитомягкие материалы. Введение Si в Fe может привести к уменьшению магнитной анизотропии. Присутствие Si также может повысить электрическое удельное сопротивление и, следовательно, уменьшить потери на вихревые токи. Структура и магнитные свойства порошка для уплотнения определяются его химическим составом и методом обработки [1].

В настоящей работе были представлены результаты исследований *ab initio* структурных и магнитных фазовых превращений в сплавах $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$ ($5 \leq x \leq 25$).

На *Рис. 1* представлена зависимость разности равновесных энергий фаз по отношению к энергии самой выгодной фазы от содержания Si в составе сплава, вычисленных в двух программных пакетах VASP и SPRKKR. Из рисунка видно, что результаты для всех трех фаз (A2, B2 и D_{03}) хорошо согласуются. Отметим, что во всем интервале концентраций наиболее выгодной является фаза D_{03} . Полученная фазовая диаграмма позволяет качественно описать экспериментальную фазовую диаграмму, представленную в работе [2].

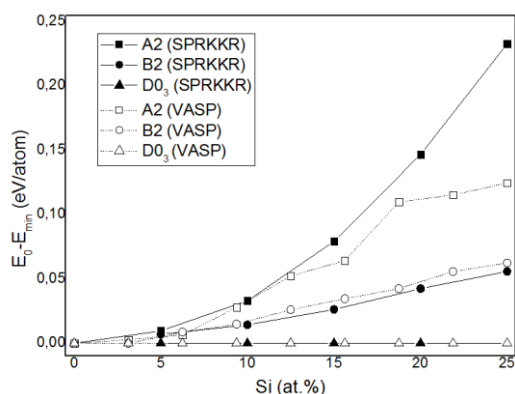


рис. 1. Разность равновесных энергий фаз, вычисленных по отношению к энергии самой устойчивой фазы (D_{03}) от содержания Si.

На *Рис. 2* представлена зависимость полного магнитного момента сплава на атом в зависимости от содержания Si в сплавах Fe–Si. Из рисунка видно, что данные, вычисленные в программном пакете SPRKKR, хорошо согласуются с данными, полученными при расчете в VASP. Из графика видно, что полный магнитный момент уменьшается для всех фаз при увеличении концентрации Si. Такая зависимость может быть объяснена тем, что Si имеет малый магнитный момент в сравнении с Fe. Полученная зависимость согласуется с экспериментальными данными [3].

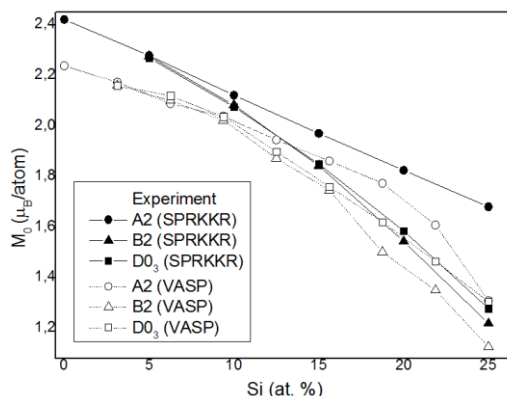


рис. 2. Зависимость полного магнитного момента сплавов Fe–Si на атом от содержания Si.

На рис. 3 представлена фазовая диаграмма магнитных и структурных температур фазовых переходов для сплавов Fe-Si от содержания Si. На рисунке представлены температуры фазовых переходов для фаз A2, B2 и D0₃ в приближении PBE, вычисленных в пакете SPRKKR. Выше этих линий устойчивы ферромагнитные состояния фаз. Так же на рисунке представлены температуры Кюри для фаз A2, B2 и D0₃ в приближении VWN и обобщенная линия температур Кюри. Эта линия показывает границу, выше которой на фазовой диаграмме находится парамагнитное состояние, ниже этой линии устойчиво ферромагнитное состояние.

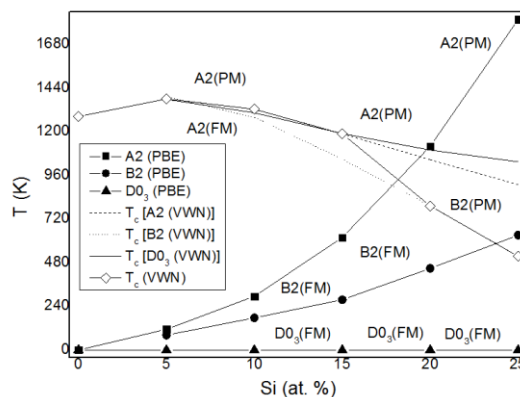


рис. 3. Фазовая диаграмма магнитных и структурных температур фазовых переходов для сплавов Fe-Si от содержания Si.

Список публикаций:

- [1] J. Füzer, P. Kollár, P. Petrovič, I. Tóth, V. Kavečanský, J. Kováč, T. Švec, *Phys. Status Solidi A* 196, 229 (2003).
- [2] O. Kubaschewski, *Iron Binary Phase Diagrams*, Springer, Berlin (1982).
- [3] L.K. Varga, F. Mazaleyrat, J. Kovac, J.M. Greneche, *J. Phys. Condens. Mat.* 14, 1985 (2002).

Расчет зонной структуры и распределения электронной плотности в AgCuS

Латыпов Тагир Рамзилович

Башикирский государственный университет

Давлетшина Алиса Данисовна, к.ф.-м.н.

davletshinaalisa@rambler.ru

Халькогениды меди и серебра $Me_{2-\delta}X$ ($Me = Cu, Ag$; $X = S, Se, Te$) проявляют высокую ионную проводимость наряду с преимущественной электронной проводимостью. Большое разнообразие физических и физико-химических свойств, возможность управления этими свойствами путем контролируемого изменения состава δ , простота кристаллической структуры делают эти системы модельными при исследовании свойств широкого класса систем со смешанной ионно-электронной проводимостью. Ионная проводимость в исследуемых соединениях осуществляется катионами и достигает величин $1-5 \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$, что сравнимо с проводимостью в растворах жидких электролитов. По электронным свойствам халькогениды меди и серебра ведут себя как полупроводники. Данные свойства обуславливают использование материалов на основе халькогенидов меди и серебра в качестве рабочих элементов различных полупроводниковых устройств (термогенераторы, катодные материалы и т.д.).

К настоящему времени явление возникновения суперионного состояния объясняется с точки зрения особенностей строения кристаллической структуры, дефектной структуры, разупорядоченности и т.д. В ряде работ возникновение высокоподвижного состояния катионов связывается с особенностями строения зонной структуры. Отсутствие системного подхода при рассмотрении высокой подвижности катионов с точки зрения электронной структуры и особенностей химической связи, делает актуальными исследования в данной области.

Исследование зонной структуры, распределения электронной плотности в халькогенидах меди и серебра и их твердых растворах представляет интерес в связи с применением их в качестве электродных материалов в электрохимических ячейках и рабочих элементов в термогенераторах.

Расчет зонной структуры и распределения электронной плотности в твердом растворе AgCuS был выполнен в рамках теории функционала электронной плотности методом псевдопотенциала в базе плоских волн, реализованный в программном пакете Quantum Espresso[1].

При расчете были использованы ультрамягкие псевдопотенциалы для серебра и меди, для халькогена – псевдопотенциалы сохраняющие норму, которые сгенерированы данной программой [2]. Энергия обрезки